数理解析研究所講究録 1340 巻 2003 年 123-133

ベイジアンネットワークにおける Beliefの$\pi-\lambda$表現可能性について

森山 和美[†] 上坂 吉則[‡] 太原 育夫[†]

† 東京理科大学大学院理工学研究科 〒277-8510 野田市山崎 2461
‡ 山梨英和大学人間文化学部 〒400-8555 甲府市横根町 888
E-mail: † j6301631@ed.noda.sut.ac.jp, tahara@is.noda.tus.ac.jp ‡ uesaka@y-eiwa.ac.jp

あらまし ベイジアンネットワークにおける確率推論は観測可能な複数の確率変数の実現値（観測値）から知りたい確率変数の事後確率分布（Belief）を得ることで行われる．このBeliefが知りたい確率変数の個々の観測値に関する事後確率と尤度のみで表わされるとき，そのBeliefは$\pi-\lambda$表現可能であるという．ベイジアンネットワークが単一結合のときは任意のBeliefはつねに$\pi-\lambda$表現可能であるといわれているが，その証明は必ずしも陽には与えられていないようである．この論文ではその証明を初等的かつ厳密に与える．また，知りたい確率変数が複数の場合は，ネットが単一結合であっても，そのBeliefは必ずしも$\pi-\lambda$表現可能ではないことを示し，一般には$\pi-\lambda$表現可能性をやや緩めた形の表現ができることを示す．

キーワード ベイジアンネットワーク，条件付独立性，Belief，単一結合

On the $\pi-\lambda$ Expressionability of Belief in Bayesian Networks

Kazumi MORIYAMA[†] Yoshinori UESAKA[‡] and Ikuo TAHARA[‡]

† Graduate School of Science and Technology, Tokyo University of Science
2461 Yamazaki, Noda, 277-8510 Japan
‡ Faculty of Humanities, Yamanashi Eiwa College 888 Yokone-chou, Kofu, 400-8555 Japan
E-mail: † j6301631@ed.noda.sut.ac.jp, tahara@is.noda.tus.ac.jp ‡ uesaka@y-eiwa.ac.jp

Abstract Probabilistic reasoning in Bayesian networks is known to get the posterior distribution (Belief) of random variables desired to infer from realized values (observations) of observable random variables. A belief is said to be $\pi-\lambda$ expressionable if the belief may be expressed by the likelihood and/or the posterior probability with respect to evidences of observable random variables. Though any belief in singly connected Bayesian networks is believed to be $\pi-\lambda$ expressionable, any explicit demonstration of the proof for this fact is hardly found in literatures. In the present paper we provide an elementary but rigorous description for the proof. In addition, we show that the belief of more than two random variables is not necessarily $\pi-\lambda$ expressionable even if the graph is singly connected and that it can be, in general, $\pi-\lambda$ expressionable in a weak sense.

Keyword Bayesian Networks, Conditional Independency, Belief, Singly connected

1. はじめに

事前に仮定したり，あるいは完全には観測できないような不確実な情報を扱うための確率的なネットワークによる情報処理が盛んに研究されるようになってきている．ベイジアンネットワーク（以後，BNと略記する）はそのような確率的ネットワークの代表的な1つである[1-3].

BNにおける確率推論は観測可能な複数の確率変数の実現値（観測値）から知りたい確率変数の事後確率分布（Belief）を得ることで行われる．このBeliefが知りたい確率変数の個々の観測値に関する事後確率と尤度のみで表わされるとき，そのBeliefは$\pi-\lambda$表現可能であるという．ベイジアンネットワークが単一結合のときは任意のBeliefはつねに$\pi-\lambda$表現可能であるといわれているが[3-4]，その証明は必ずしも陽には与えられていないようである．この論文ではその証明を初等的かつ厳密に与える．また，知りたい確率変数が複数の場合は，BNが単一結合であっても，そのBeliefは必ずしも$\pi-\lambda$

表現可能ではないことを示し，一般には$\pi-\lambda$表現可能性をやや緩めた形の表現ができることを示す．

2. 諸定義と準備

BN はグラフ的な構造の上に成り立っている．そこでまずグラフに関する基礎的な概念を，議論に必要な最小限の範囲内で，準備することから始めよう．

Vを空でない有限集合とし，Vの相異なる 2 元の対のいくつかから成る集合$\vec{E}$：

(1)　$\vec{E} \subseteq \{(v,v') \mid v,v' \in V, v \neq v'\}$

を考える．このとき，Vと$\vec{E}$の対：

(2)　$\vec{G} := (V,\vec{E})$

を**有向グラフ**という．Vの元を$\vec{G}$の**頂点**，$\vec{E}$の元を$\vec{G}$の**有向辺**とそれぞれいう．

有向辺(v,v')をvからv'への矢印として表せばグラフを視覚的に見ることができる．たとえば，頂点の集合$V=\{v_1,v_2,v_3\}$と有向辺の集合$\vec{E}=\{(v_1,v_2),(v_1,v_3),(v_2,v_3)\}$を持つ有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$は視覚的に

(3)
$$\begin{array}{ccc} & v_1 & \\ \swarrow & & \searrow \\ v_2 & \rightarrow & v_3 \end{array}$$

と描くことができるなどである．

また，Vを空でない有限集合とし，Vの相異なる 2 元から成る集合のいくつかから成る集合：

(4)　$E \subseteq \{\{v,v'\} \mid v,v' \in V, v \neq v'\}$

を考える．このとき，VとEの対$G:=(V,E)$を**無向グラフ**という．Vの元をGの**頂点**，Eの元をGの**無向辺**とそれぞれいう．

有向グラフ$\vec{G}:=(V,\vec{E})$に対して無向辺の集合：

(5)　$E := \{\{v,v'\} \mid (v,v') \in \vec{E}\}$

を定める．このとき，$G:=(V,E)$を**有向グラフ$\vec{G}$から定まる無向グラフ**という．

有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$の有向辺$(v,v') \in \vec{E}$において，vをv'の**親**といい，v'をvの**子**という．また，頂点$v \in V$のすべての**親の集合**をΠ_vで表し，すべての子の集合をΓ_vで表すことにする．

有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$を考える．その頂点$v,v' \in V$に対してある整数$m(\geq 1)$と頂点$v_1,\ldots,v_{m-1} \in V$が存在して

(6)　$(v,v_1),(v_1,v_2),\ldots,(v_{m-1},v') \in \vec{E}$

が成り立つとき，v'はvの**子孫**であるという．

1. 定義　有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$が**非巡回**であるとは$\vec{G}$のどの頂点も自分自身の子孫ではないことをいう．□

また$\vec{G}$の無向グラフを$G:=(V,E)$とし，その頂点$v,v' \in V$に対してある整数$m(\geq 1)$と頂点$v_1,\ldots,v_{m-1} \in V$が存在して

(7)　$\{v,v_1\},\{v_1,v_2\},\ldots,\{v_{m-1},v'\} \in E$

が成り立つとき，v'はvと**連結**しているという．この関係は同値関係とはならないが，対称律と推移律を満たすので，「v'はvと連結している」をしばしば「v'とvは連結している」ともいうことにする．グラフ$\vec{G}$の相異なる任意の 2 点がつねに連結しているとき，$\vec{G}$は**連結**しているという．

つぎにこの連結という概念を用いて単一結合を定義するが，これは本論文で扱う BN の範囲を限定するのに用いられる．

2. 定義　無向グラフ$G=(V,E)$が**単一結合**であるとはGのどの頂点も自分自身と連結していないことをいう．また有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$が**単一結合**であるとはその無向グラフが単一結合であることをいう．□

子孫と連結の定め方から明らかなようにv'がvの子孫であれば，v'とvは連結しているが，その逆は必ずしも成り立たない．このことから直ちにつぎの命題が得られる．

3. 命題　有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$が単一結合ならばそれは非巡回でもある．しかし，この逆は必ずしも

成り立たない．□

たとえば，有向グラフ(3)は非巡回ではあるが単一結合ではない．

BN は確率的な推論をする情報処理機構であるので当然のことながら確率変数とそれから定まる事象の生起する確率や確率分布に関する記述が多く用いられる．しかしながらそれらを伝統的な記法に従って正直に（厳密に）記述しようとすると，表現がいたずらに煩雑になることが多い．そこでこの難点を回避するために以下のような便法（略記法）を用いることにする．

以後ある固定された確率空間 (Ω,A,P) 上の離散値をとる確率変数を扱う．ここに Ω,A,P はそれぞれ標本空間，Ω 上の σ-集合体（事象の集合），A 上の確率測度である．$X_1,\ldots,X_r$ を (Ω,A,P) 上の離散値をとる確率変数とする．このとき，事象 $\{\omega \mid X_1(\omega)=x_1,\ldots,X_r(\omega)=x_r\}$ が生起する確率は通常 $P(\{X_1=x_1\}\cap\cdots\cap\{X_r=x_r\})$ あるいはもっと簡略に $P(X_1=x_1,\ldots,X_r=x_r)$ などと書かれるが，この小論では，数式が煩雑になるのを避けて，より簡潔に

(8)　$P(x_1,\ldots,x_r)$

と略記することにする．特に確率変数の集合を意識する場合には，たとえば，$S=\{X_1,\ldots,X_r\}$ とおいたとき，上の(8)は，S の小文字を用いて

(9)　$P(s)$

と略記することにする．条件付確率についても同様である．さらに確率の和についても

(10)　$\sum_{x_1,\ldots,x_r} P(X_1=x_1,\ldots,X_r=x_r)$ を $\sum_s P(s)$

などのように略記することとする．

以上の準備のもとに BN の形式的な定義を与えよう．これは議論を正確に展開するのに欠かせないことである．

4. 定義　確率変数 $X_1,\ldots,X_r$ を頂点とするある有向グラフ $\vec{G}=(V,\vec{E})$ を考える．ここに $V=\{X_1,\ldots,X_r\}$ である．各 X_i の親の集合を Π_{X_i} とする．このとき

(11)　$P(x_1,\ldots,x_r)=P(x_1 \mid \pi_{X_1})\cdots P(x_r \mid \pi_{X_r})$

がすべての $x_1,\ldots,x_r$ について成り立つとき，グラフ $\vec{G}$ は確率変数 $X_1,\ldots,X_r$ の上の **Bayesian Net**（以後，簡単に BN と略記する）であるという．ここに(11)は略記法に従っている．□

いったん確率変数 $X_1,\ldots,X_r$ が与えられるとその分布 $P(x_1,\ldots,x_r)$ が定まる．一方，$X_1,\ldots,X_r$ を頂点とするグラフは確率分布とは無関係に考えることができ，したがってそれらの親の集合 $\Pi_{X_1},\ldots,\Pi_{X_r}$ も分布とは無関係に（グラフより一意に）定まることになる．したがって一般には(11)が成り立つとはかぎらない．特に(11)が成り立つような確率変数達とグラフの対を考えたときにそれを BN というのである．

つぎに BN による推論の枠組みを考える．

5. 定義　確率変数の集合 $S=\{X_1,\ldots,X_r\}$ の上の BN において X を S の元，E を S の（X を含まない）空でない部分集合とする．このとき E に属する確率変数達がある実現値 e をとるという事象が生起したという条件のもとで X がある実現値 x をとるという事象が生起する条件付確率 $P(X=x \mid E=e)$ がすべての x についてわかれば，事象 $\{E=e\}$ を観測することによって X がどんな値をどのような確率でとり得るかが，すなわち，X についての推論ができることになる．この条件付確率を

(12)　$BEL(x \mid e) := P(x \mid e)$

で表し，観測 E に基づく X の **Belief** という．□

推定したい確率変数が複数の場合の Belief も考えることができる．たとえば，X,Y を S の元，E を S の（X,Y を含まない）空でない部分集合とする．このとき E に属する確率変数達がある実現値 e をとるという事象が生起したという条件のもとで X と Y がある実現値 x と y それぞれをとるという事象が生起する条件付確率 $P(X=x,Y=y \mid E=e)$ がすべての x,y についてわかれば，事象 $\{E=e\}$ を観測することによって X,Y がどんな値をどのような確率でとり得るかが，すなわち，X,Y についての推論ができることになる．この条件付確率を

(13)　$BEL(x,y \mid e) := P(x,y \mid e)$

で表し，観測Eに基づくX,Yの**複数 Belief**という．推定したい確率変数が3個以上の場合も同様である．なお，推定したい確率変数が1個の場合のBeliefを特に**単数 Belief**と呼ぶことにする．

つぎのような，確率変数$X_1,\dots,X_6$の上のBN：

$$
(14)\quad
\begin{array}{ccccc}
X_1 & \to & X_3 & \to & X_5 \\
 & \nearrow & & \nearrow & \\
X_2 & & X_4 & \to & X_6
\end{array}
$$

において，$X=X_3$，$E=\{X_2,X_5\}$である場合の単数 Belief：$BEL(x|e)$は

(15)　$P(x_3|x_2,x_5)$

なる条件付確率分布のことであり，$X=X_3,Y=X_4$，$E=\{X_2,X_5\}$である場合の複数 Belief：$BEL(x,y|e)$は

(16)　$P(x_3,x_4|x_2,x_5)$

なる条件付確率分布のことにほかならない．

3. 単数 Beliefの$\pi-\lambda$表現可能性

この節では単一結合でかつ連結なBNにおいては単数Beliefはある特殊な形（後述する$\pi-\lambda$表現）につねに書けることを示す．この事実は多くの文献（たとえば[3]）ですでに指摘されていることではあるが，筆者の知る範囲では，その証明は陽には与えられていないようである．そこで初等的かつ厳密な形での証明を与えることにする．そのためにグラフに関して若干の準備をすることとする．

$\vec{G}=(V,\vec{E})$を有向グラフとし，WをVの空でない部分集合とする．このとき，Wと$\vec{F}:=\{(w,w')\in\vec{E}\mid w,w'\in W\}$の対$\vec{H}:=(W,\vec{F})$を$W$から定まる$\vec{G}$の**部分グラフ**という．

$\vec{G}=(V,\vec{E})$を有向グラフとし，vを$\vec{G}$の任意の頂点とする．このとき，vと連結している$\vec{G}$の頂点全体から成る集合をvの**連結頂点集合**といい，C_vで表すことにする．$\vec{G}$が単一結合のときはvはそれ自身とは連結していないので，C_vはvを含んでいない．

$\vec{G}=(V,\vec{E})$を有向グラフとし，vを$\vec{G}$の任意の頂点とする．このとき，頂点の集合$V(v):=V\setminus\{v\}$から定まる$\vec{G}$の部分グラフを$\vec{G}(v)=(V(v),\vec{E}(v))$とする．また，$\vec{G}(v)$の頂点$x\in V(v)$の連結頂点集合を$C_x(v)$で表すことにする．このとき，頂点の集合：

$$
(17)\quad v^+:=\Pi_v\cup\left(\bigcup_{x\in\Pi_v}C_x(v)\right),\ v^-:=\Gamma_v\cup\left(\bigcup_{y\in\Gamma_v}C_y(v)\right)
$$

を頂点xのそれぞれ**上流**，**下流**という．ここにΠ_vとΓ_vはそれぞれvの親の集合，子の集合である．

たとえば，つぎのグラフ：

$$
(18)\quad
\begin{array}{ccccc}
v_1 & \to & v_3 & \to & v_5 \\
 & \nearrow & & \nearrow & \\
v_2 & & v_4 & \to & v_6
\end{array}
$$

において$\Pi_{v_3}=\{v_1,v_2\}$，$C_{v_1}(v_3)=C_{v_2}(v_3)=\varnothing$であるから$v_3$の上流は$v_3^+=\{v_1,v_2\}$であり，$\Gamma_{v_3}=\{v_5\}$，$C_{v_5}(v_3)=\{v_4,v_6\}$であるから$v_3$の下流は$v_3^-=\Gamma_{v_3}\cup C_{v_5}(v_3)\ =\{v_4,v_5,v_6\}$である．このとき頂点の集合$V=\{v_1,\dots v_6\}$は$v_3$とその上流と下流の直和になっている：$V=\ \{v_3\}+v_3^++v_3^-$．

これは一般の単一結合のグラフについていえることで，つぎの命題が成り立つ．

6. 命題　有向グラフ$\vec{G}=(V,\vec{E})$は単一結合でかつ連結であるとする．vを$\vec{G}$の任意の頂点とする．このとき$\vec{G}$の頂点の集合Vはvとその上流v^+と下流v^-の直和に分解できる：

(19)　$V=\{v\}+v^++v^-$.

したがって，このときにはv^+とv^-を1つの頂点のように考えて，$\vec{G}$を

(20)　$v^+\to v\to v^-$

のようにも表すことにする．たとえば，(18)のグラフは$v_3^+\to v_3\to v_3^-$のようにも描くことにする．

証明　頂点の集合$V(v):=V\setminus\{v\}$から定まる$\vec{G}$の部分グラフを$\vec{G}(v):=(V(v),\vec{E}(v))$で表すことにし，$\vec{G}(v)$の無向グラフを$G(v):=(V(v),E(v))$とする．

$V=V(v)+\{v\}$に注意すれば，(19)を示すには，$V(v)=V\setminus\{v\}$がv^+とv^-の直和になっていることを示せばよい．それには$V(v)=v^+\cup v^-$と$v^+\cap v^-=\varnothing$とを示せばよい．以下これらを順に示そう．

まず，$V(v)=v^+\cup v^-$を示す．それには$V(v)\subseteq v^+\cup v^-$と$V(v)\supseteq v^+\cup v^-$を示せばよい．まず，後者を示す．$v$の上流$v^+$と下流$v^-$は，その定め方により，

(21) $v^+ := \Pi_v \cup \left(\bigcup_{x\in\Pi_v} C_x(v) \right), v^- := \Gamma_v \cup \left(\bigcup_{y\in\Gamma_v} C_y(v) \right)$

と与えられることに注意する．親と子の定義により，

(22) $\Pi_v, \Gamma_v \subseteq V(v)$

が成り立つ．また，(21)の$C_x(v)$と$C_y(v)$はグラフ$\bar{G}(v)$におけるxやyの連結頂点の集合であるから，

(23) $C_x(v), C_y(v) \subseteq V(v)$

が成り立つ．したがって，(21)に注意して，$V(v)\supseteq v^+\cup v^-$を得る．

つぎに$V(v)\subseteq v^+\cup v^-$を背理法で示す．もしそうでなかったとすると，ある$u\in V(v)$が存在して$u\notin v^+\cup v^-$が成り立つことになる．そうすると，以下で見るように，このuとvは連結していないことがわかり，これは$\bar{G}$が連結しているという前提に矛盾することになる．

それではuとvは連結していないことを示そう．仮にuとvが連結しているとすると無向辺の列

(24) $\{v, w_1\}, \ldots, \{w_m, u\}$

が存在し，$u\in C_{w_1}(v)$が成り立つ．したがって，w_1がvの親であるときは$w_1\in\Pi_v$が成り立つから，

(25) $u \in v^+ = \Pi_v \cup \left(\bigcup_{x\in\Pi_v} C_x(v) \right)$

となり，$u\notin v^+\cup v^-$に矛盾する．また，w_1がvの子であるときは$w_1\in\Gamma_v$が成り立つから，

(26) $u \in v^- = \Gamma_v \cup \left(\bigcup_{y\in\Gamma_v} C_y(v) \right)$

となり，このときも$u\notin v^+\cup v^-$に矛盾する．

最後に$v^+\cap v^-=\varnothing$を背理法で示す．すなわち，ある頂点uが$v^+\cap v^-$に存在するとしてみよう．(21)に注意すれば，$v^+\cap v^-$は

(27) $v^+\cap v^- = \{\Pi_v \cap \Gamma_v\} \cup \left\{ \bigcup_{x\in\Pi_v} \Gamma_v \cap C_x(v) \right\} \cup \left\{ \bigcup_{y\in\Gamma_v} \Pi_v \cap C_y(v) \right\} \cup \left\{ \bigcup_{x\in\Pi_v, y\in\Gamma_v} C_x(v)\cap C_y(v) \right\}$

と展開される．したがって，$u\in v^+\cap v^-$に注意すれば，つぎの4つのいずれかが成り立つことになる：

(28) $u \in \Pi_v \cap \Gamma_v$,

(29) $u \in \bigcup_{x\in\Pi_v} \Gamma_v \cap C_x(v)$,

(30) $u \in \bigcup_{y\in\Gamma_v} \Pi_v \cap C_y(v)$,

(31) $u \in \bigcup_{x\in\Pi_v, y\in\Gamma_v} C_x(v)\cap C_y(v)$.

これらのいずれが成り立つ場合も矛盾が出ることを以下に示そう．

(28)が成り立つときは，$u\in\Pi_v$と親の定め方により，vとuはグラフ$\bar{G}$において連結しており，また，$u\in\Gamma_v$と子の定め方により，uとvはグラフ$\bar{G}$において連結している．したがってvはv自身と連結していることになり，これは$\bar{G}$が単一結合であることに矛盾する．

(29)が成り立つときは，$x\in\Pi_v$と親の定め方により，vとxはグラフ$\bar{G}$において連結しており，$u\in C_x(v)$と連結頂点集合の定義により，xとuはグラフ$\bar{G}$において連結しており，さらに$u\in\Gamma_v$と子の定め方により，uとvはグラフ$\bar{G}$において連結している．したがってvはv自身と連結していることに

なり，これは$\bar{G}$が単一結合であることに矛盾する．

(30)が成り立つときは，$y \in \Gamma_v$と子の定め方により，vとyはグラフ$\bar{G}$において連結しており，$u \in C_y(v)$と連結頂点集合の定義により，yとuはグラフ$\bar{G}$において連結しており，さらに$u \in \Pi_v$と親の定め方により，uとvはグラフ$\bar{G}$において連結している．したがってvはv自身と連結していることになり，これは$\bar{G}$が単一結合であることに矛盾する．

(31)が成り立つときは，$x \in \Pi_v$と親の定め方により，vとxはグラフ$\bar{G}$において連結しており，$u \in C_X(v)$と連結頂点集合の定義により，xとuはグラフ$\bar{G}$において連結しており，$u \in C_Y(v)$と連結頂点集合の定義により，uとyはグラフ$\bar{G}$において連結しており，さらに$y \in \Gamma_v$と子の定め方により，yとvはグラフ$\bar{G}$において連結している．したがってvはv自身と連結していることになり，これは$\bar{G}$が単一結合であることに矛盾する．

以上の考察から，けっきょく，$v^+ \cap v^- \neq \emptyset$を仮定すると矛盾が導かれることがわかる．したがって$v^+ \cap v^- = \emptyset$を得る．□

つぎにBeliefの表現形式を明確に定めることにする．

7. 定義　$\bar{G}$を確率変数の集合W上の単一結合でかつ連結なBNとし，XをWの元，S,TをXのそれぞれ上流，下流とする．このとき，命題6により，Wは$\{X\}$とSとTの直和であり，$\bar{G}$は$S \to X \to T$という形に描くことができる．また，E^+,E^-をそれぞれS,Tの部分集合とし，$E^+(E^-)$に属する確率変数の実現値$e^+(e^-)$が観測されるとする．このときのXに関するBeliefがXの事後確率：

(32)　$\pi(x|e^+) := P(x|e^+)$

と尤度：

(33)　$\lambda(x|e^-) := P(e^-|x)$

の積によって，定数倍の不定さを除いて，表されるとき，XのBeliefは**$\pi-\lambda$表現可能**であるという．□

(14)のBNにおいて$X = X_3$とすると，$S = \{X_1, X_2\}$，$T = \{X_4, X_5, X_6\}$である．$E^+ = \{X_2\}$，$E^- = \{X_5\}$である場合のBelief：$BEL(x|e)$は，のちに示す定理11により，

(34)　$BEL(x|e) = c\pi(x_3|e^+)\lambda(x_3|e^-)$

と表されることがわかる．ここにcは定数である．したがって，このBNにおいてXのBeliefは$\pi-\lambda$表現可能であるということになる．

この節の主要な結果は定理11であるが，その証明には補題9が本質的である（実際には，この補題から容易に導かれる系10が使われる）．つぎの補題はそれを示すための準備で，グラフの性質に関するものであるが，証明も容易であり，直感的にも明らかであるから，証明は省略する．

8. 補題　$\bar{G}$を確率変数の集合W上の単一結合でかつ連結なBNとし，XをWの元，S,TをXのそれぞれ上流，下流とする．すると，命題6により，Wは$\{X\}$とSとTの直和であり，$\bar{G}$は$S \to X \to T$という形に描くことができる．このとき，Tの中に子を持たない頂点が少なくとも1つは存在する．

証明　Tに属する頂点から成る部分グラフを$\bar{H} = (T, \bar{F})$とする．単一結合の定め方から明らかなように，単一結合のグラフの部分グラフはまた単一結合であるから，$\bar{H}$は単一結合である．したがって命題3によって$\bar{H}$は非巡回でもある．このことに注意して，背理法で補題を示す．

すなわち，いまTのすべての頂点が少なくとも1つの子を持つとしてみよう．まず，$Z_0 \in T$を任意にとり固定する．するとZ_0の子$Z_1 \in T$が存在する：$(Z_0, Z_1) \in \bar{F}$．また，Z_1の子$Z_2 \in T$が存在する：$(Z_1, Z_2) \in \bar{F}$．さらに，
Z_2の子$Z_3 \in T$が存在する：$(Z_2, Z_3) \in \bar{F}$．こうして続けていくと，親子，すなわち，有向辺の無限列：

(35)　$(Z_0, Z_1), (Z_0, Z_1), \ldots, (Z_{m-1}, Z_m), \ldots \in \bar{F}$

が得られ，したがって頂点の無限列：

(36)　$Z_0, Z_1, \ldots, Z_{m-1}, Z_m, \ldots \in T$

が得られる．しかし，この列の隣同士は異なった頂点であり，Tは有限集合であるから，十分大きなmに対して同じ頂点，たとえば，Z_kが現れることになる．(35)に注意すれば，この頂点Z_kはそれ自身の子孫でもあり，このことは$\bar{H}$が非巡回であることに矛盾する．□

9. 補題　$\bar{G}$ を確率変数の集合 W 上の単一結合でかつ連結な BN とし，X を W の元，S,T を X のそれぞれ上流，下流とする．すると，命題 6 により，W は $\{X\}$ と S と T の直和であり，$\bar{G}$ は $S \to X \to T$ という形に描くことができる．このとき，S と T は X のもとで条件付独立である．すなわち，

$$P(s,t\,|\,x) = P(s\,|\,x)P(t\,|\,x) \tag{37}$$

が成り立つ．

証明　T に属する確率変数の個数に関する帰納法で示す．まず，T がただ一つの確率変数 Z_1 から成るときは，BN は $S \to X \to Z_1$ となり，$\Pi_{Z_1} = \{X\}$ である．したがって BN の定義により

$$\begin{aligned}(38)\quad &\left(\prod_{y \in s} P(y\,|\,\pi_Y)\right) P(x\,|\,\pi_X) P(z_1\,|\,x)\\ &= \left(\prod_{y \in s} P(y\,|\,\pi_Y)\right) P(x\,|\,\pi_X) P(z_1\,|\,\pi_{Z_1})\\ &= P(s,x,z_1) = P(s)P(x\,|\,s)P(z_1\,|\,s,x)\end{aligned}$$

が成り立つ．Π_Y や Π_X は Z_1 を含まないから，この辺々の x_1 についての和をとれば

$$\left(\prod_{y \in s} P(y\,|\,\pi_Y)\right) P(x\,|\,\pi_X) = P(s)P(x\,|\,s) \tag{39}$$

を得る．これを(38)に用いると $P(z_1\,|\,x) = P(z_1\,|\,s,x)$ を得る．この右辺に $P(z_1\,|\,s,x) = P(z_1,s\,|\,x)/P(s\,|\,x)$ を代入すれば $P(z_1,s\,|\,x) = P(z_1\,|\,x)P(s\,|\,x)$ を得るが，これは S と Z_1 が X のもとで条件付独立であることを示している．これで T の要素数が 1 の場合の補題が示された．

つぎに T の要素数が m のときに補題が成り立つとする（帰納法の仮定）．この仮定のもとに，T が $Z_1,\ldots,Z_m,Z_{m+1}$ なる $m+1$ 個の頂点から成る場合に補題が成り立つことを示す．

われわれの BN は単一結合であるから，補題 8 により，T の中に子を持たない頂点が少なくとも 1 つは存在する．それを，一般性を失うことなく，$W := Z_{m+1}$ とし，$T = R \cup \{W\} = \{Z_1,\ldots,Z_m,W\}$ と表すことにする．このとき，$S \to X \to R \to W$ なる BN を考えていることになる．BN の定義より

$$\begin{aligned}(40)\quad &\left(\prod_{y \in s} P(y\,|\,\pi_Y)\right) P(x\,|\,\pi_X) \left(\prod_{z \in r} P(z\,|\,\pi_Z)\right) P(w\,|\,\pi_W)\\ &= P(s,x,r,w) = P(s)P(x\,|\,s)P(r\,|\,s,x)P(w\,|\,s,x,r)\end{aligned}$$

が成り立つ．ここで R のどの頂点 Z の親集合 Π_Z も W を含まないことに注意して(40)の辺々の w についての
和をとれば

$$\begin{aligned}(41)\quad &\left(\prod_{y \in s} P(y\,|\,\pi_Y)\right) P(x\,|\,\pi_X) \left(\prod_{z \in r} P(z\,|\,\pi_Z)\right)\\ &= P(s)P(x\,|\,s)P(r\,|\,s,x)\end{aligned}$$

を得る．これを(40)に用いると

$$P(w\,|\,\pi_W) = P(w\,|\,s,x,r) = \frac{P(w,s,r\,|\,x)}{P(s,r\,|\,x)}, \tag{42}$$

すなわち，

$$P(w\,|\,\pi_W)P(s,r\,|\,x) = P(w,s,r\,|\,x) \tag{43}$$

を得る．ところが $S \to X \to R$ においては，帰納法の仮定により，S と R は X のもとで条件付独立であるから，

$$P(s,r\,|\,x) = P(s\,|\,x)P(r\,|\,x) \tag{44}$$

が成り立っている．これを(43)に用いると

$$P(w\,|\,\pi_W)P(s\,|\,x)P(r\,|\,x) = P(w,s,r\,|\,x) \tag{45}$$

を得る．この辺々の s についての和をとれば

(46) $P(w|\pi_W)P(r|x) = P(w,r|x)$

を得る．これを(45)に用いると

(47) $P(s|x)P(w,r|x) = P(w,s,r|x)$

を得る．すなわち，S と $T = R \cup \{W\}$ は X のもとで条件付独立である．□

10. 系　補題 9 と同じ記法のもとで，E^+,E^- をそれぞれ S,T の空でない部分集合とする．このとき，E^+ と E^- は X のもとで条件付独立である：

(48) $P(e^+,e^-|x) = P(e^+|x)P(e^-|x)$.

証明　補題 9 により

(49) $P(s,t|x) = P(s|x)P(t|x)$

が成り立つ．この辺々の $S \setminus E^+$ と $T \setminus E^-$ に属する確率変数の実現値についての和をとると

(50) $$P(e^+,e^-|x) = \sum_{s\setminus e^+ \cup t\setminus e^-} P(s,t|x)$$

$$= \left(\sum_{s\setminus e^+} P(s|x)\right)\left(\sum_{t\setminus e^-} P(t|x)\right) = P(e^+|x)P(e^-|x)$$

を得る．□

11. 定理　$\bar{G}$ を確率変数の集合 W 上の単一結合でかつ連結な BN とし，X を W の元，S,T を X のそれぞれ上流，下流とする．すると，命題 6 により，W は $\{X\}$ と S と T の直和であり，$\bar{G}$ は $S \to X \to T$ という形に描くことができる．また，E^+,E^- をそれぞれ S,T の空でない部分集合とし，これが観測されるとする．このとき，X の Belief は $\pi-\lambda$ 表現可能である．

証明　X の Belief は，その定義により，

(51) $$BEL(x|e^+,e^-) = P(x|e^+,e^-)$$

$$= \frac{1}{P(e^+,e^-)} P(e^-|x,e^+)P(x|e^+)P(e^+)$$

と書くことができる．ここで系 10 により，E^+ と E^- は X のもとで条件付独立であるから

(52) $P(e^-|x,e^+) = P(e^-|x)$

が成り立つ．これを(51)に用いると

(53) $$BEL(x|e^+,e^-) = \frac{P(e^+)}{P(e^+,e^-)} P(e^-|x)P(x|e^+)$$

$$= \frac{P(e^+)}{P(e^+,e^-)} \lambda(X=x|E^-=e^-)\pi(X=x|E^+=e^+)$$

を得る．□

4. 複数 Belief の $\pi-\lambda$ 表現可能性

この節では推定したい確率変数が複数個ある場合の Belief，すなわち，複数 Belief の $\pi-\lambda$ 表現可能性について検討する．簡単のため，推定したい確率変数が 2 個の場合について議論をするが，その個数を 3 個以上の場合に拡張することは，記法が煩雑になるだけで，本質的な困難はない．

まず，$\pi-\lambda$ 表現可能となる場合を命題 12 と 13 で与える．

12. 命題　E^+,E^- を確率変数の集合とし，X,Y,E_1,E_2 を確率変数とする．これらの確率変数達の上の

(54) $$\begin{array}{ccccccccc} & & & & E_1 & & & & \\ & & & & \downarrow & & & & \\ E^+ & \to & X & \to & E_2 & \to & Y & \to & E^- \end{array}$$

$$
\begin{array}{ccccccccc}
 & & & & E_1 & & & & \\
 & & & & \uparrow & & & & \\
E^+ & \to & X & \to & E_2 & \to & Y & \to & E^-
\end{array} \tag{55}
$$

で表される，単一結合で連結な BN を考える．また，E^+,E^-,E_1,E_2 が観測されるとする．このとき，X,Y の Belief は $\pi-\lambda$ 表現可能である．

証明 まず，X,Y の Belief は

$$BEL(x,y|e^+,e_1,e_2,e^-) = P(x,y|e^+,e_1,e_2,e^-) = \frac{P(x,y,e^+,e_1,e_2,e^-)}{P(e^+,e_1,e_2,e^-)} \tag{56}$$

と書けることに注意する．一方，条件付確率の定義により，E^+,X,E_1,E_2,Y,E^- の同時分布は

$$P(e^+,x,e_1,e_2,y,e^-) = P(e^+)P(x|e^+)P(e_1,e_2|e^+,x)P(y|e^+,x,e_1,e_2)P(e^-|e^+,x,e_1,e_2,y) \tag{57}$$

と展開できる．ところが e^+,x,e_1,e_2 と e^- は y のもとで条件付独立であるから $P(e^-|e^+,x,e_1,e_2,y)=P(e^-|y)$．また，$e^+,x$ と y は e_1,e_2 のもとで条件付独立であることが補題 9 と同様にして示されるから $P(y|e^+,x,e_1,e_2)=P(y|e_1,e_2)$．さらに e_1,e_2 と e^+ は x のもとで条件付独立であるから $P(e_1,e_2|e^+,x)=P(e_1,e_2|x)$．これらを(57)に用いると同時分布は

$$P(e^+,x,e_1,e_2,y,e^-) = P(e^+)P(x|e^+)P(e_1,e_2|x)P(y|e_1,e_2)P(e^-|y) \tag{58}$$

となる．これを(56)に用いると

$$
\begin{aligned}
BEL &\propto P(x|e^+)P(e_1,e_2|x)P(y|e_1,e_2)P(e^-|y) \\
&\propto \pi(x|e^+)\lambda(x|e_1,e_2)\pi(y|e_1,e_2)\lambda(y|e^-)
\end{aligned} \tag{59}
$$

となり，$\pi-\lambda$ 表現可能であることがわかる．ここに BEL は $BEL(x,y|e^+,a,b,e^-)$ の略記であり，$p \propto q$ は p と q が比例することを表す．□

13. 命題 E^+,E^- を確率変数の集合とし，X,Y,A,E を確率変数とする．これらの確率変数達の上の

$$
\begin{array}{ccccccccc}
 & & & & A & & & & \\
 & & & & \downarrow & & & & \\
E^+ & \to & X & \to & E & \to & Y & \to & E^-
\end{array} \tag{60}
$$

あるいは

$$
\begin{array}{ccccccccc}
 & & & & A & & & & \\
 & & & & \uparrow & & & & \\
E^+ & \to & X & \to & E & \to & Y & \to & E^-
\end{array} \tag{61}
$$

で表される，単一結合で連結な BN を考える．また，E^+,E^-,E で観測されるとする．このとき，X,Y の Belief は $\pi-\lambda$ 表現可能である．

証明 まず，X,Y の Belief は

$$BEL(x,y|e^+,e,e^-) = P(x,y|e^+,e,e^-) = \frac{P(x,y,e^+,e,e^-)}{P(e^+,e,e^-)} \propto \sum_a P(e^+,x,a,e,y,e^-) \tag{62}$$

と書けることに注意する．一方，条件付確率の定義により，E^+,X,A,E,Y,E^- の同時分布は

$$P(e^+,x,a,e,y,e^-) = P(e^+)P(x|e^+)P(a,e|e^+,x)P(y|e^+,x,a,e)P(e^-|e^+,x,a,e,y) \tag{63}$$

と展開できる．ところが e^+,x,a,e と e^- は y のもとで条件付独立であるから $P(e^-|e^+,x,a,e,y)=P(e^-|y)$．また，$e^+,x$ と y は a,e のもとで条件付独立であることが補題 9 と同様にして示されるから $P(y|e^+,x,a,e)=P(y|a,e)$．さらに a,e と e^+ は x のもとで条件付独立であるから $P(a,e|e^+,x)=P(a,e|x)$．これらを(63)に用いると同時分布は

$$P(e^+,x,a,e,y,e^-) = P(e^+)P(x|e^+)P(a,e|x)P(y|a,e)P(e^-|y) \tag{64}$$

となる．これを(62)に用いると

(65) $BEL \propto P(x|e^{+})\left[\sum_{a} P(a,e|x)P(y|a,e)\right]P(e^{-}|y)$

と書くことができる．

ここで(60)の BN について考える．そこでは y と a は e のもとで条件付独立であるから，$P(y|a,e)=P(y|e)$ が成り立ち，したがって

(66) $BEL \propto P(x|e^{+})\left[\sum_{a} P(a,e|x)\right]P(y|e)P(e^{-}|y)$

$\propto P(x|e^{+})P(e|x)P(y|e)P(e^{-}|y)$

$\propto \pi(x|e^{+})\lambda(x|e)\pi(y|e)\lambda(y|e^{-})$

となり，$\pi-\lambda$ 表現可能であることがわかる．

つぎに(61)の BN について考える．そこでは x と a は e のもとで条件付独立であるから，

(67) $P(a,e|x)=P(e|x)P(a|e,x)=P(e|x)P(a|x)$

が成り立ち，したがって

(68) $P(a,e|x)P(y|a,e)=P(e|x)P(a|x)P(y|a,e)$

$=P(e|x)P(y,a|e)$

を得る．これを(65)に用いると

(69) $BEL \propto P(x|e^{+})P(e|x)\left[\sum_{a} P(y,a|e)\right]P(e^{-}|y)$

$\propto P(x|e^{+})P(e|x)P(y|e)P(e^{-}|y)$

$\propto \pi(x|e^{+})\lambda(x|e)\pi(y|e)\lambda(y|e^{-})$

となり，$\pi-\lambda$ 表現可能であることがわかる．

ゆえにいずれの場合も $\pi-\lambda$ 表現可能である．□

14. 命題　E^{+},E^{-} を確率変数の集合とし，X,Y,A,E を確率変数とする．これらの確率変数達の上の

(70)
$$\begin{array}{ccccccccc} & & & & E & & & & \\ & & & & \downarrow & & & & \\ E^{+} & \rightarrow & X & \rightarrow & A & \rightarrow & Y & \rightarrow & E^{-} \end{array}$$

あるいは

(71)
$$\begin{array}{ccccccccc} & & & & E & & & & \\ & & & & \uparrow & & & & \\ E^{+} & \rightarrow & X & \rightarrow & A & \rightarrow & Y & \rightarrow & E^{-} \end{array}$$

で表される，単一結合で連結な BN を考える．また，E^{+},E^{-},E で観測されるとする．このとき，X,Y の Belief はいずれも

(72) $BEL(x,y|e^{+},e,e^{-})$

$\propto \pi(x|e^{+})\left[\sum_{a} \lambda(x|a,e)\pi(y|a,e)\right]\lambda(y|e^{-})$

で与えられる．

この結果はいままでとは異なり，Belief に観測しない確率変数を含んだ事後確率や尤度を含んだ形になっており，$\pi-\lambda$ 表現が可能でないことを示している．しかし，一応，事後確率と尤度で Belief が表されているから，この場合は $\pi-\lambda$ 擬表現可能であると呼んでいいであろう．

証明　命題 13 とまったく同様にして

(73) $BEL \propto P(x|e^{+})\left[\sum_{a} P(a,e|x)P(y|a,e)\right]P(e^{-}|y)$

を得るが，命題 13 のように，Y と A や E と A の条件付独立性は必ずしもいえないので，Belief の変形はここ止まりである．□

この命題が示しているように，推定したい確率変数が複数になるとその Belief はもはや π-λ 表現可能ではなくなる．

5. おわりに

単一結合で連結な BN において単数 Belief はつねに π-λ 表現可能であるが，複数 Belief では必ずしもそうではないことを示した．特に補題 9 の証明の過程からわかるように，着目している確率変数の上流は必ずしも単一結合でなくても π-λ 表現可能性がいえる．

これらのことから，複数 Belief での π-λ 表現可能性はどのような条件のもとで保障されるかという問題と単数 Belief での π-λ 表現可能性を保存したまま単一結合の仮定をどこまで緩めることができるかという問題がでてくる．これらは今後の研究課題である．

文　献

[1] M.I. Jordan(ed.), Learning in Graphical Models, MIT Press, 1999.

[2] 本村陽一，佐藤泰介，“ベイジアンネットワークー不確定性のモデリング技術ー，”人工知能学会誌，15 巻，4 号，pp.1-8，July 2000.

[3] J. Pearl, Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems : Networks of Plausible Inference, San Francisco, CA, Morgan Kaufman, 1988.

[4] 鈴木譲，“ベイジアンネットワークにおける確率伝播について，” ベイジアンネットチュートリアル講演論文集，pp.14-26，2001.